

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ ПОЛИДИСПЕРСНОГО АНСАМБЛЯ ВЫДЕЛЕНИЙ ВТОРОЙ ФАЗЫ С УЧЁТОМ РАЗЛИЧИЯ В СОСТАВЕ ВЫДЕЛЕНИЙ

*Пасынков А.Ю. *, Горбачев И.И.*

Руководитель – к.ф.-м.н. Горбачёв И.И.

Институт физики металлов УрО РАН, г.Екатеринбург.

apasynkov@list.ru*

Предложен метод моделирования эволюции ансамбля частиц второй фазы в многокомпонентном металлическом сплаве при термической обработке на всех стадиях: роста, растворения и коагуляции. Этот алгоритм является развитием численного метода, предложенного в [1], но, в отличие от него, учитывает различие в составе частиц.

При построении модели было сделано несколько допущений. Предполагалось, что все выделения имеют сферическую форму и постоянный состав, на межфазных границах устанавливается локальное термодинамическое равновесие, а массоперенос осуществляется объемной диффузией в основной фазе (матрице). Кроме того, не учитывалось влияние упругих напряжений на условия локального равновесия и массоперенос в системе.

В предложенной модели исходными данными служат объемная доля выделений (F) и распределение частиц по размерам в исходном состоянии. Распределение частиц по размерам задаётся несколькими гистограммами, соответствующих выделениям различного состава. В этих гистограммах k -му размерному классу частиц ставится в соответствие доля частиц, попадающая в данный размерный интервал. Метод основан на использовании приближения среднего поля, в котором считается, что концентрации всех элементов на некотором расстоянии от частиц одинаковы (одинаковое среднее окружение). Для расчёта распределения концентраций диффундирующих компонентов используется квазистационарное приближение, то есть в уравнениях диффузии пренебрегается производной по времени. С учетом этого массоперенос в ячейке k -го размерного класса для N -компонентной системы выражается следующими уравнениями:

$$\sum_{j=1}^N \tilde{D}_{ij} \frac{\partial C_j^k}{\partial r} = \frac{K_i^k}{r^2} \quad (1)$$

где r – пространственная переменная, $C_j^k(r)$ – концентрация j -го компонента в ячейке k -го интервала размеров; \tilde{D}_{ij} – парциальные коэффициенты взаимной диффузии; K_i^k – константы, а r – пространственная переменная.

Условия баланса масс на межфазной границе между частицей k -го размерного класса и матрицей имеют вид:

$$\left[{}^P C_i v_m^M / v_m^P - {}^{M/P} C_i^k \right] \frac{dR_k}{d\tau} = \frac{K_i^k}{r^2} \Big|_{r=R_k} \quad (2)$$

где v_m^P и v_m^M - молярные объемы фазы выделения и матрицы соответственно; ${}^{M/P} C_i$ и ${}^P C_i$ - концентрации i -го компонента в матрице на границе с выделением и в выделении, соответственно, τ - время, а R_k - средний радиус частиц k -го интервала размеров.

Условия локального термодинамического равновесия на межфазной границе имеют вид:

$$\bar{G}_i^{p/m} + \frac{2 \cdot \sigma \cdot v^P}{R_k} = \bar{G}_i^{m/p} \quad (3)$$

где $\bar{G}_i^{p/m}$ и $\bar{G}_i^{m/p}$ - химические потенциалы i -го элемента на межфазной границе в частице и матрице соответственно; σ - удельная поверхностная энергия межфазной границы выделение/матрица.

Кроме того, использование квазистационарного приближения заставляет добавить к этим уравнениям условие сохранения массы, которому должны удовлетворять рассчитанные концентрации компонентов в матрице:

$$\alpha {}^P C_i + (1 - \alpha) \bar{C}_i = C_i^0 \quad (4)$$

где α - мольная доля фазы выделения, \bar{C}_i - средняя концентрация растворенного компонента в матрице, C_i^0 - концентрация растворенного компонента в сплаве.

Зная объемную долю частиц и их распределение по размерам, можно в результате совместного решения уравнений (1)-(4) рассчитать скорости движения межфазных границ для частиц всех размерных интервалов. В предложенной модели данные уравнения решаются численно методом Ньютона для системы уравнений с использованием метода конечных разностей для расчета распределений концентраций компонентов в ячейках. Для полевых ячеек всех размерных классов строятся пространственные сетки, первый узел которых (узел 0) совпадает с межфазной границей, а последний (узел n) - с границей ячейки. При этом учитывается то обстоятельство, что конечно-разностная аппроксимация дифференциальных уравнений тем менее точна, чем более резко изменяются концентрации элементов. Изменения концентраций диффундирующих элементов наиболее сильны вблизи межфазных границ. По этой причине используются неравномерные пространственные сетки, более плотные вблизи межфазных границ. В результате решения уравнений находятся радиусы частиц и их объемная доля на новом временном слое, которые служат исходными данными для расчетов на следующем временном шаге. Эта процедура повторяется до тех пор, пока не будет достигнуто нужное время.

На основе предложенной модели создана программа для моделирования

эволюции выделений в сталях, легированных V, Nb и Ti. С помощью данной программы были проведены расчёты для низколегированных сталей с карбонитридным упрочнением, в которых исследовалось поведение карбонитридных выделений в процессе отжига. Пример результатов расчётов для стали с 0.11 мас. % C, 0.008 мас. % N, 0.09 мас. % Nb и 0.02 мас. % Ti приведён на рисунке, где показано изменение среднего радиуса и объемной доли частиц $Ti_{0.925}Nb_{0.074}N_{0.973}C_{0.027}$ и NbC, а также всего ансамбля (первых и вторых вместе) во время отжига при температуре 1200°C.

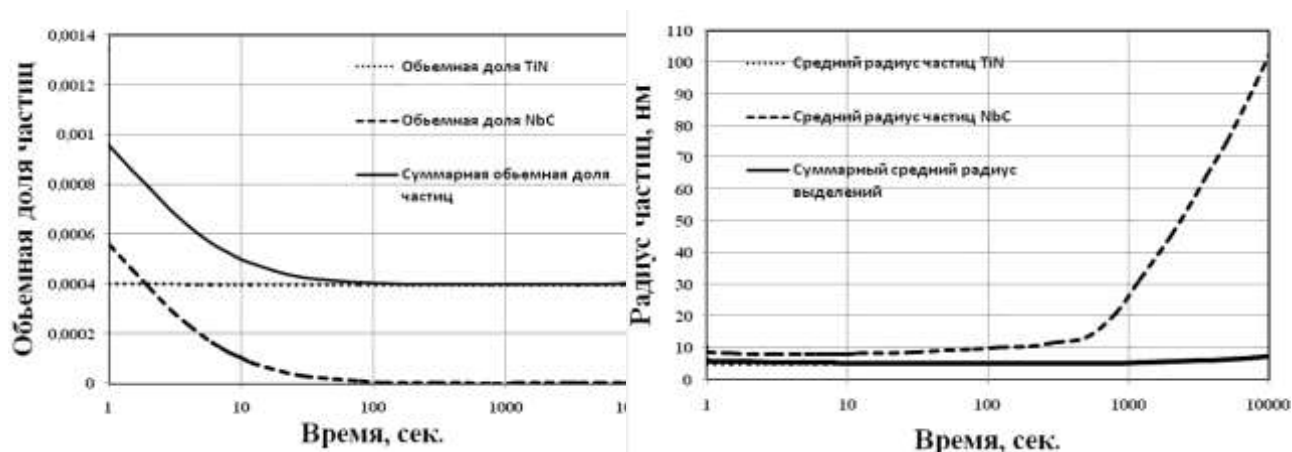


Рисунок 1. изменение среднего радиуса и объемной доли частиц $Ti_{0.925}Nb_{0.074}N_{0.973}C_{0.027}$ и NbC, а также всего ансамбля во время отжига при температуре 1200°C.

Список публикаций:

[1] Попов В.В., Горбачев И.И. // ФММ. 2003. Т. 95. № 5. С. 16.